



TITLE:

経路積分法による半古典的ランジュ  
ュヴァン方程式の新しい導出法(非  
平衡系統計力学の基礎研究懇話会-  
久保セミナー第1回-,研究会報告)

AUTHOR(S):

橋爪, 夏樹

---

CITATION:

橋爪, 夏樹. 経路積分法による半古典的ランジュヴァン方程式の新しい  
導出法(非平衡系統計力学の基礎研究懇話会-久保セミナー第1回-,研究  
会報告). 物性研究 1987, 48(6): 718-726

ISSUE DATE:

1987-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92814>

RIGHT:

- 57) T. Tominaga and T. A., J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 93.
- 58) T. A., M. Ban and F. Shibata, Physica **123A** (1984) 131.
- 59) M. Ban and T. A., J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 939.
- 60) T. A. and Y. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 2233.
- 61) M. Ban and T. A., Physica **129A** (1985) 455.
- 62) M. Ban and T. A., J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 1759.
- 63) P. Martin and J. Schwinger, Phys. Rev. **115** (1959) 1342.
- 64) S. Fujita, J. Math. Phys. **6** (1965) 1877.
- 65) T. A., J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 1054.
- 66) 投稿準備中。
- 67) L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20** (1965) 1018.

## 経路積分法による半古典的ランジュヴァン方程式の新しい導出法

お茶の水女子大 橋 爪 夏 樹

### § 1. 緒 論

ランジュヴァン方程式は平均の過程を定める減衰方程式に揺動力項を加えて作られるのが普通である。そして揺動力は白色スペクトルをもつガウス過程であると仮定することが多い<sup>1)</sup>。Onsagerはこの仮定をもう少し物理的な原理で置き換えようと試みた<sup>2)</sup>。しかしこれらは何れも現象論的アプローチであり、また揺動力のスペクトルが白色でない場合<sup>3)</sup>へのOnsager流の物理的解釈法の拡張も行われていない。

状態変化の経路の確率という概念が第1原理から入っているのは量子力学である<sup>4)</sup>。古典力学の場合は統計集団として確率概念を導入するの外はない。ランジュヴァン方程式を量子力学のハイゼンベルグ運動方程式を変形して導出する試みは森理論以来多数行われている<sup>5)</sup>。しかしこれらは揺動力に対する形式的な表現を与えるのみで、確率過程としての確率分布を直接与えるものではない。量子力学に本来そなわっている経路の確率を変形して、揺動力の経路確率を導出しようという試みを報告したい<sup>6)</sup>。

### § 2. Onsager の考え

Einsteinによれば、熱平衡状態での熱力学変数  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots)$  の熱揺動分布を表わす

確率密度  $W(\alpha)$  は、孤立系の熱平衡条件を表わす変分原理

$$S(\alpha) = \underset{\alpha}{\text{maximum}} \quad (2.1)$$

に対応して次式で与えられる：

$$k_B \ln W(\alpha) = S(\alpha) + \text{const.} \quad (2.2)$$

$S(\alpha)$  は状態  $\alpha$  で系がもつエントロピー、 $k_B$  はボルツマン定数である。

状態  $\alpha$  の平均の時間変化を定める減衰型方程式

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = \sum_j G_{ij} \frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha_j} \quad (2.3)$$

を与える変分原理はエネルギー散逸極小の原理である：

$$\Phi(\dot{\alpha}, \dot{\alpha}) - \left( \frac{dS}{dt} \right)_{\text{irr}}(\alpha, \dot{\alpha}) = \underset{\dot{\alpha}}{\text{minimum}}. \quad (2.4)$$

ここに  $\Phi(\dot{\alpha}, \dot{\alpha})$  は散逸関数、 $(dS/dt)_{\text{irr}}$  はエントロピー生成速度で次式で与えられる：

$$\left. \begin{aligned} \Phi(\dot{\alpha}, \dot{\alpha}) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} R_{ij} \dot{\alpha}_i \dot{\alpha}_j, \\ \left( \frac{dS}{dt} \right)_{\text{irr.}} &= \sum_i \frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha_i} \dot{\alpha}_i. \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

$R = G^{-1}$  は抵抗係数である。(2.4) で変分は  $\alpha$  を固定し、速度  $\dot{\alpha}$  について行うから、状態  $\alpha$  から出発し、微小時間後に到達する状態を定める。(2.2) との類推から、Onsager は遷移確率が次式で与えられることを予言した<sup>7)</sup>：

$$\begin{aligned} k_B \ln \Psi(\alpha + \Delta\alpha, t + \Delta t \mid \alpha, t) \\ = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{\Phi(\Delta\alpha, \Delta\alpha)}{\Delta t} - (\Delta S)_{\text{irr.}} \right\} + \text{const.}(\alpha). \end{aligned} \quad (2.6)$$

孤立系であるから  $dS/dt = (dS/dt)_{\text{irr.}}$  であって、 $(\Delta S)_{\text{irr.}} = S(\alpha + \Delta\alpha) - S(\alpha)$  となる。Onsager は実際には相反定理に関する第2論文の末尾で複分確率

$$\begin{aligned} W(\alpha + \Delta\alpha, t + \Delta t; \alpha, t) \\ = \Psi(\alpha + \Delta\alpha, t + \Delta t \mid \alpha, t) W(\alpha) \end{aligned}$$

に対する式を与えている。この方が(2.2) との類推は一層明らかであろう。 $\Phi(\Delta\alpha, \Delta\alpha)$

は  $\dot{\alpha}$  の所に  $\Delta\alpha$  を代入したものである。

(2.6) を書替えて,

$$\Psi(\alpha + \Delta\alpha, t + \Delta t | \alpha, t) \\ \propto \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{R_{ij}}{2k_B \Delta t} \left\{ \Delta\alpha_i - \sum_k G_{ik} \frac{\partial S}{\partial \alpha_k} \Delta t \right\} \left\{ \Delta\alpha_j - \sum_l G_{jl} \frac{\partial S}{\partial \alpha_l} \Delta t \right\} \right] \quad (2.7)$$

とすると, (2.3) に対応するランジュヴァン方程式

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = \sum_j G_{ij} \frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha_j} + F_i(t) \quad (2.8)$$

を時区間  $(t, t + \Delta t)$  上で積分した形と比べて分かるように, 揺動力  $F(t)$  の分布を与えている。しかし Onsager は揺動力を消去する方針にこだわったようで, マルコフ過程を仮定して (2.7) の積を作り, 経路  $\alpha(t)$  の確率を求めるとき,

$$\Psi[\alpha(t); t_a \leq t \leq t_b] \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2k_B} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\alpha, \dot{\alpha}) dt \right\} \quad (2.9)$$

の形を選ぶのである。ここに  $\mathcal{L}(\alpha, \dot{\alpha})$  は熱力学的ラグランジアンとでも呼ぶべき量で,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\alpha, \dot{\alpha}) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} R_{ij} \left( \dot{\alpha}_i - \sum_k G_{ik} \frac{\partial S}{\partial \alpha_k} \right) \left( \dot{\alpha}_j - \sum_l G_{jl} \frac{\partial S}{\partial \alpha_l} \right) \\ &= \Phi(\dot{\alpha}, \dot{\alpha}) + \Phi^{-1} \left( \frac{\partial S}{\partial \alpha}, \frac{\partial S}{\partial \alpha} \right) - \left( \frac{dS}{dt} \right)_{\text{irr.}} \end{aligned} \quad (2.10)$$

と表わされる。 $\Phi^{-1}$  は  $R$  の代りに  $G$  を用いた散逸関数である。遷移確率は (2.9) の経路積分で与えられる:

$$\Psi(\alpha_b, t_b | \alpha_a, t_a) \propto \int_{\alpha(t_a)=\alpha_a}^{\alpha(t_b)=\alpha_b} \mathcal{D}\alpha \exp \left\{ -\frac{1}{2k_B} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\alpha, \dot{\alpha}) dt \right\} \quad (2.11)$$

Onsager-Machlup の第2論文では, 系が運動エネルギーを持ち, 平均過程が加速度  $\ddot{\alpha}$  を含む減衰振動型方程式で記述される場合を論じているが, この場合は熱力学的力  $\partial S / \partial \alpha$  にダランベールの慣性力に相当する項を加えたものを  $\partial S / \partial \alpha$  の代りに用いることによって, やはり (2.11) の形に表わすのである。

筆者は揺動力の経路確率の方にこだわった。それは  $\dot{\alpha}$  を定める減衰型方程式の場合は (2.10) の第2辺から明らかであるが,  $\ddot{\alpha}$  を定める減衰振動型方程式の場合にも, (2.9) は結局は同じ揺動力の経路確率

$$W[F(t); t_a \leq t \leq t_b] \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \sum_{i,j} \frac{R_{ij}}{2k_B} F_i(t) F_j(t) dt \right\} \quad (2.12)$$

に導くからである。そもそも stochastic problem は過程  $F(t)$  を与えて過程  $\alpha(t)$  を定めるもので、揺動力の経路確率の方が基本量である。(2.12) は時間積分を1重に含むから、ガウス・マルコフ過程を表わし、昔ながらのモーメントの式を与える：

$$\langle F_i(t) \rangle = 0, \quad \langle F_i(t) F_j(t') \rangle = 2k_B G_{ij} \delta(t-t'). \quad (2.13)$$

非マルコフ・ガウス過程へ拡張するには時間積分を2重に含むようにする必要がある。それと同時に減衰項を時間畳込み型にする必要がある。

### §3. Feynman の経路積分

一般化座標  $Q = (Q_1, Q_2, \dots)$  とラグランジアン  $L(Q, \dot{Q})$  を持つ孤立系の古典的運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial Q_i} = 0 \quad (3.1)$$

は良く知られているように、最小作用の原理

$$\int_{t_a}^{t_b} L(Q, \dot{Q}) dt = \text{extremum}_{Q(t)} \quad (3.2)$$

から導かれる。Feynman は Dirac にならって、これを遷移確率振幅を与えるものとした：

$$\langle Q_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_b - t_a)} | Q_a \rangle = \int_{Q(t_a)=Q_a}^{Q(t_b)=Q_b} \mathcal{D}Q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(Q, \dot{Q}) dt \right\} \quad (3.3)$$

$\mathcal{H}$  はラグランジアン  $L$  に対応するハミルトン演算子である。遷移確率にすれば、

$$\begin{aligned} & \Psi(Q_b, t_b | Q_a, t_a) \\ &= \langle Q_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_b - t_a)} | Q_a \rangle \langle Q_a | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_b - t_a)} | Q_b \rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

となる。これは純粋状態の初期密度行列  $|Q_a\rangle\langle Q_a|$  の時間発展として得られる密度行列の対角要素をとったものであるが、(3.3) を用いると  $Q_a$  から出発して  $Q_b$  に到達する2本の経路  $Q(t)$ ,  $Q'(t)$  についての経路積分で書けることを示す。

ランジュヴァン方程式を得るには粗視化を行う必要があるが、以下では計算をきれいにするため、着目する系(座標  $Q$ ) に熱源(座標  $X$ ) を付け、後者について平均してしまうことにする。すなわち初期状態の密度行列としては、マスター方程式の導出で良く仮定されるように、系のもの  $|Q_a\rangle\langle Q_a|$  に熱源のもの  $\hat{\rho}_B$  を乗じた形をとると、遷移確率は次式で与えられる：

$$\begin{aligned} \Psi(Q_b, t_b | Q_a, t_a) &= \langle Q_b | \text{Tr}_B (e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_B + \hat{\mathcal{H}}_I)}(t_b - t_a)) \\ &\cdot | Q_a \rangle \langle Q_a | \hat{\rho}_B e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_B + \hat{\mathcal{H}}_I)(t_b - t_a)} | Q_b \rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

ここに  $\hat{\mathcal{H}}$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_B$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_I$  は系, 熱源, 両者間の相互作用のハミルトン演算子である。これらに対応する古典ラグランジアンを  $L(Q, \dot{Q})$ ,  $L_B(X, \dot{X})$ ,  $L_I(Q, X)$  とすると, Feynman-Vernon<sup>7)</sup> によれば (3.5) は次の形に書ける:

$$\begin{aligned} \Psi(Q_b, t_b | Q_a, t_a) &= \int_{Q(t_a)=Q'(t_a)=Q_a}^{Q(t_b)=Q'(t_b)=Q_b} \mathcal{D}Q \mathcal{D}Q' \mathcal{F}_{ba}[Q, Q'] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \{ L(Q, \dot{Q}) - L(Q', \dot{Q}') \} dt \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

ただし  $\mathcal{F}_{ba}[Q, Q']$  は熱源による影響汎関数で,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{ba}[Q, Q'] &= \iint dX_b dX'_b \delta(X_b - X'_b) \iint dX_a dX'_a \langle X_a | \hat{\rho}_B | X'_a \rangle \\ &\cdot \int_{X(t_a)=X_a}^{X(t_b)=X_b} \mathcal{D}X \int_{X'(t_a)=X'_a}^{X'(t_b)=X'_b} \mathcal{D}X' \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \{ L_B(X, \dot{X}) - L_B(X', \dot{X}') \} dt \right] \\ &\cdot \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \{ L_I(Q, X) - L_I(Q', X') \} dt \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

と与えられる。以下簡単のために相互作用項は  $Q$  について 1 次であるとする:

$$L_I(Q, X) = \sum_i Q_i K_i(X) \quad (3.8)$$

この場合の系の古典運動方程式は次の形となる:

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L(Q, \dot{Q})}{\partial \dot{Q}_i} \right\} - \frac{\partial L(Q, \dot{Q})}{\partial Q_i} = K_i(X). \quad (3.9)$$

すなわち  $K(X)$  は熱源が系に作用する力を表わしているが, 熱源の微視的状态  $X(t)$  に依存するから, (3.9) はいわば微視的運動方程式である。これに前述の粗視化を行うとき右辺が平均的な力と揺動力とに分割されることを示したいのである。或は別の言い方をすれば, (3.9) は粗視化をしないときの最確経路を与えるが, 粗視化をしたときの最確経路はどう見えるかということになる。

スピン・グラスの問題などでも, ソフト・スピンの運動を定めるランジュヴァン方程式をそ

の中に現われる交換相互作用について平均したとき、平均後のランジュヴァン方程式と新しい揺動力の確率分布は何うなるかが調べられている<sup>8)</sup>。この場合も、(2.12)の形の経路積分を交換相互作用について静的ガウス分布で平均した結果を、またランジュヴァン方程式に戻す手法が使われている。経路積分を実際に計算するのではなく、いわば変形するのである。

#### § 4. ランジュヴァン方程式の導出。

線型応答の久保理論に相当する結果を得るには、系に対する外力  $K(X)$  について2次までの摂動計算をすればよい。(3.7)で言えば、 $L_I$ を含む指数関数を展開して  $X(t)$ ,  $X'(t)$  の経路積分を実行するのであるが、具体的には量子力学の演算子  $K(\hat{X}(t))$  およびその積の密度行列  $\hat{\rho}_B$  による平均の形に書き表わせばよい。そして久保・富田<sup>9)</sup>がやったように、その結果を再び指数関数の肩に上げて、キュムラント展開の形にする。これは Feynman-Vernon もやっている。これで粗視化の手続きは実行されたことになるが、 $Q$  のランジュヴァン方程式を得るには遷移確率(3.6)を  $Q_a$  から出発し  $Q_b$  に到達する1本の経路についての積分の形に直さねばならない。この操作は半古典近似をとることで実行できる。

Winger の位相空間分布で良く知られているように、位置座標は  $Q$  表示の密度行列要素の2本の足の平均で与えられるから、

$$Q_i(t) = q_i(t) + \frac{1}{2} \xi_i(t), \quad Q'_i(t) = q_i(t) - \frac{1}{2} \xi_i(t) \quad (4.1)$$

の  $q(t)$  が求める経路を与える。 $\xi(t)$  は経路  $q(t)$  からのはずれに関係するので、それについてガウス近似をすれば半古典近似が得られる。(3.6)の  $L(Q, \dot{Q}) - L(Q', \dot{Q}')$  は  $\xi$  について展開すると1次、3次…の項をもつが、 $\xi^2$ まで求めるには1次の項のみでよい。 $\xi$  の項は  $\xi(t_a) = \xi(t_b) = 0$  によって部分積分を行う。計算結果は

$$\begin{aligned} & \Psi(Q_b, t_b | Q_a, t_a) \\ &= \int_{q(t_a)=Q_a}^{q(t_b)=Q_b} \mathcal{D}q \int_{\xi(t_a)=0}^{\xi(t_b)=0} \mathcal{D}\xi \exp \left( -\frac{1}{2\hbar^2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} ds \sum_{i,j} C_{ij}(t,s) \xi_i(t) \xi_j(s) \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_i \xi_i(t) \left[ \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_i} \right\} - \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial q_i} - \langle K_i(\hat{X}(t-t_a)) \rangle_B \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \int_{t_a}^t ds \sum_j \Psi_{ij}(t,s) q_j(s) \right] \right) \end{aligned}$$

$$\propto \int_{q(t_a)=Q_a}^{q(t_b)=Q_b} \mathcal{D}q \exp \left[ -\frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} ds \sum_{i,j} D_{ij}(t,s) F_i(t) F_j(s) \right]. \quad (4.2)$$

最後の辺に移るには  $\xi(t)$  についてのガウス積分を行った。それと時間添字まで含めた  $C$  の逆行列  $D$  が現われた:

$$\int_{t_a}^{t_b} dt' \sum_j D_{ij}(t, t') C_{jk}(t', s) = \delta_{ij} \delta(t-s). \quad (4.3)$$

また最後の辺中の  $F(t)$  は第2辺中の  $\xi$  の1次の係数である:

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_i} \right\} - \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial q_i} \quad (4.4)$$

$$= \langle K_i(\hat{X}(t-t_a)) \rangle_B - \int_{t_a}^t ds \sum_j \Psi_{ij}(t, s) q_j(s) + F_i(t).$$

これらの式に現われた行列  $C$ ,  $\Psi$  は外力  $K(\hat{X})$  の対称化積相関と交換子相関である:

$$C_{ij}(t, s) = \langle \frac{1}{2} [K_i(\hat{X}(t-t_a)) - \langle K_i(\hat{X}(t-t_a)) \rangle_B, K_j(\hat{X}(s-t_a)) - \langle K_j(\hat{X}(s-t_a)) \rangle_B]_+ \rangle_B, \quad (4.5)$$

$$\Psi_{ij}(t, s) = \langle \frac{1}{i\hbar} [K_i(\hat{X}(t-t_a)) - \langle K_i(\hat{X}(t-t_a)) \rangle_B, K_j(\hat{X}(s-t_a)) - \langle K_j(\hat{X}(s-t_a)) \rangle_B]_- \rangle_B. \quad (4.6)$$

問題によっては(4.4)の形で良いのであるが、通常形にするには  $\hat{\rho}_B$  がカノニカル分布となる場合を考えて、カノニカル相関

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}(t, s) &= \int_0^\beta d\lambda \langle \{K_j(\hat{X}(s-t_a - i\hbar\lambda)) - \langle K_j(\hat{X}(s-t_a - i\hbar\lambda)) \rangle_B\} \\ &\quad \cdot \{K_i(\hat{X}(t-t_a)) - \langle K_i(\hat{X}(t-t_a)) \rangle_B\} \rangle_B \end{aligned} \quad (4.7)$$

を導入する。良く知られているように

$$\Psi_{ij}(t, s) = \frac{d\Phi_{ij}(t, s)}{dt} = -\frac{d\Phi_{ij}(t, s)}{ds} \quad (4.8)$$

が成立するので、部分積分を行うと、(4.4)は



$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_i} \right\} - \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial q_i} = \langle K_i(\hat{X}(t-t_a)) \rangle_B - \sum_j \Phi_{ij}(t, t_a) Q_{ai} \\ + \sum_j \Phi_{ij}(t, t) q_j(t) - \int_{t_a}^t ds \sum_j \Phi_{ij}(t, s) \dot{q}_j(s) + F_i(t) \quad (4.9)$$

と書ける。(4.2)から経路積分の被積分関数を取り出せば、揺動力  $F(t)$  の経路確率が求まる:

$$W[F(t); t_a \leq t \leq t_b] \\ \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} ds \sum_{i,j} D_{ij}(t, s) F_i(t) F_j(s) \right\}. \quad (4.10)$$

これは非マルコフ・ガウス分布であって、次のモーメントを与える:

$$\langle F_i(t) \rangle = 0, \quad \langle F_i(t) F_j(t') \rangle = C_{ij}(t, t'). \quad (4.11)$$

## §5. 結 語

(4.9)(4.10)によって半古典的ランジュヴァン方程式が得られたが、その中に現れる揺動力  $F(t)$  のゆらぎは(4.11)(4.5)により量子力学的な力  $K(\hat{X}(t))$  の対称化積相関で与えられている。さらに(4.9)の時間畳み込み型減衰項中の積分核はカノニカル相関(4.7)で与えられ、揺動散逸定理<sup>10)</sup>が満たされている:

$$C_{ij}(t, s) = E_\beta \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Phi_{ij}(t, s). \quad (5.1)$$

ただし  $E_\beta(\hbar\omega) = (\hbar\omega/2) \coth(\beta\hbar\omega/2)$ 。(3.9)と(4.9)を比べて見れば粗視化によって外力  $K$  が平均力と揺動力とに分割されたことが分かる。

半古典的ランジュヴァン方程式の導出のみであれば量子力学を持出すまでもないかもしれないが、演算子  $\hat{Q}(t)$  に対する方程式を得るように拡張することも可能であろう。その場合には縮約密度行列そのものを扱い、(3.5)のように対角要素をとらぬ方法を用いねばならないので、可成り複雑となろう。また  $\xi^2$  まで考えてガウス近似を行ったが、それを保証したければ、熱源のサイズの逆数でのキュムラント展開という形にして、中央極限定理を援用すればよいであろう。これが最も普通の場合であろうが、熱源によっては非ガウス分布をもつ揺動力を導出できる可能性も捨て難い。そのような場合のキュムラント展開の形も考えてみたいが、将来の問題である。

引用文献

- 1) M.C.Wang and G.E.Uhlenbeck: Rev. Mod. Phys. 17 (1945) 323.
- 2) L. Onsager: Phys. Rev. 38 (1931) 2265; L. Onsager and S. Machlup: Phys. Rev. 91 (1953) 1505, 1512.
- 3) R. Kubo in "Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics I", Syokabo (1966).
- 4) R.P.Feynmann: Rev. Mod. Phys. 20 (1948) 367.
- 5) H. Mori: Prog. Theor. Phys. 33 (1965) 423.
- 6) N. Hashitsume, M. Mori and T. Takahashi: J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 1887.
- 7) N. Hashitsume: Prog. Theor. Phys. 8 (1952) 461; 15 (1956) 369.
- 8) H. Sompolinsky and A. Zippelius: Phys. Rev. B25 (1982) 6860.
- 9) R. Kubo and K. Tomita: J. Phys. Soc. Jpn. 9 (1954) 888.
- 10) R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. 12 (1957) 570; Rep. Prog. Phys. 29/1 (1966) 255.

む す び

慶大・理工 久保亮五

今日は思いがけなく盛大な懇話会になって大変楽しませていただきました。のんびり皆さんのお話を伺うだけと思っていたので、まとめといったものの用意もないので、ただここで思いつくことをちょっと話してこの会の結びにさせていただきます。

線型応答理論にしても、論理をトコトン詰めようとすれば、わからないことだらけだ、というのは柴田君のいう通りです。そもそも統計力学じたい、その基礎は明確ではありませんが、平衡系についてはその妥当性を疑うひとはいないでしょう。線型応答理論は、それを延長しているところに味噌があるわけですから、親の因果をひきつぐのは仕方ありません。一方、誤解もあると思うので、そういうことのいくらかは、統計物理学の英訳版 Statistical Physics II (Springer Verlag 1985) に書き加えておきました。

初心に帰れば、運動方程式から、運動論へ、ということですが、それには Born-Green-Kirkwood-Ivon 以後さほど新しい発展はないように思います。非平衡量子統計力学の歴史もながいわけですが、非平衡の現象のどこまでが古典、量子の別に拘わらないのか、どこが本質的に量子的であるのか、それもハッキリしているとはいえないでしょう。そういうことにあまりこだわらないで、具体的な問題を量子多体問題の強力な方法によって料理することに熱